

Projekt 3.1 Synergia metod NMR i spektroskopii optycznej w badaniach fotochemii i fotostabilności związków chemicznych

Promotor: dr hab. Jacek Waluk. Kontakt: jwaluk@ichf.edu.pl / dr Tomasz Ratajczyk

Instytut: Chemii Fizycznej PAN

Zespół: Zespół 30. Hiperpolaryzacja jądrowa układów molekularnych i nanomateriałów - dr Tomasz Ratajczyk

www: <https://applied-nmr.pl/>

<http://mail.photoscience.pl/>

Opis:

Reakcje fotochemiczne są powszechne i istotne w naturze oraz wykorzystywane w zaawansowanych technologiach i przemyśle zielonej energii. Do badania procesów fotochemicznych niezbędna jest odpowiednia metodologia. Spektroskopie optyczne, takie jak UV-vis, są szybkie, czułe i powszechnie stosowane do badania fotochemii cząsteczek. Metody te jednak często nie są w stanie określić struktury powstających fotoproduktów. W przeciwieństwie do nich techniki NMR dostarczają informacji o strukturze cząsteczkowej. Jednak NMR jest stosunkowo wolną metodą, więc widma NMR często pokazują uśredniony obraz wielu struktur będących w równowadze, co utrudnia ich interpretację.

Spektrofotometria, spektrofluorymetria oraz spektroskopia NMR są komplementarne. Dlatego odpowiednia kombinacja tych metod znacząco przyczyni się do badania reakcji fotochemicznych.

Istnieją jednak pewne problemy techniczne. W szczególności, czułość ^1H NMR i absorpcji UV-vis różni się o kilka rzędów wielkości na korzyść spektroskopii optycznej. Kwestia ta może wpływać na przebieg fotoreakcji, który może zależeć od stężenia substratów i zanieczyszczeń (ślądów wody, tlenu itp.). Obecnie istnieje zainteresowanie opracowaniem metod, które złagodzą ten problem..

Cel projektu:

Celem tego projektu doktorskiego jest opracowanie metodologii opartej na połączeniu NMR i spektroskopii optycznych. Projekt ma na celu wykorzystanie opracowanej metodologii do badania kluczowych cząsteczek fotoaktywnych i fotoprocessów. W szczególności planowane jest badanie cząsteczek fotochromowych, takich jak β -enaminony.

Wymagania:

- Magisterium w dziedzinie nauk chemicznych lub pokrewnych dziedzin;
- doświadczenie w spektroskopii będzie atutem;
- komunikatywna znajomość języka angielskiego